

化学・物質工学セミナー

以下の通りセミナーを開催致します。万障お繰り合わせの上、ご参加ください。

第 736 回例会

日時：2023 年 11 月 17 日(金)14:00～15:00

場所：工学部 1 号館 12 番講義室

講師：後藤 仁志 教授（豊橋科学技術大学 情報基盤メディアセンター）

演題：「計算化学から観えるケモマテリアルズインフォマティクス」

本セミナーでは、最近急速に発展している「マテリアルズインフォマティクス(MI)と計算化学」に関する集中レクチャーとして、両分野に造詣の深い先生をお招きしてご講演いただきます。

後藤仁志先生は、分子動力学法ソフトウェア「CONFLEX」の開発者として計算化学分野で著名であると同時に、化学データベース構築をはじめとする化学情報学(ケモインフォマティクス)に関しても多数の業績を上げておられます。

後藤先生が長崎県工業技術センターに来訪される機会に、同センターのシミュレーション技術研究会(2023 年度第 2 回)との共催として本セミナーを企画しました。

ご参加の程、どうぞよろしくお願い致します。

【概要】

その昔、計算機を使った化学の研究分野には「理論化学」と「化学情報学」の二つがありました。三十数年前、「計算化学」という用語が登場し、今では、理論化学と化学情報学を巻き込むだけでなく、計算科学(高速計算)や AI 技術を通じて、様々な異分野の世界へと広がり、新たな進化を始めています。例えば、単分子の精密な計算から物質の特性を導いてきた理論化学の手法は、物性物理で使われていた手法と組み合わせ、固体や溶液といった複合体系やアンサンブル系の物質・材料の精密計算を実現し始めています。また、社会のデジタル変革を牽引する最先端 AI 技術は、同時に、化学研究の方法論に変革をもたらそうとしています。特にシミュレーションと大規模データを基盤としたデータ駆動型の研究スタイルは、次世代研究者にとってスタンダードになると思われます。

本セミナーでは、最近出版された「計算化学第 3 版」を紹介しながら計算化学を俯瞰的に捉えながら、計算化学の最新とっピックスを紹介します。また、ケモマテリアルズインフォマティクスを志向する上で必要になる最新の機械学習技術についても概説します。

セミナー世話人

工学研究科・物質科学部門 木村正成 (masanari@nagasaki-u.ac.jp)

長崎県工業技術センター 重光保博 (shige@tc.nagasaki.go.jp)